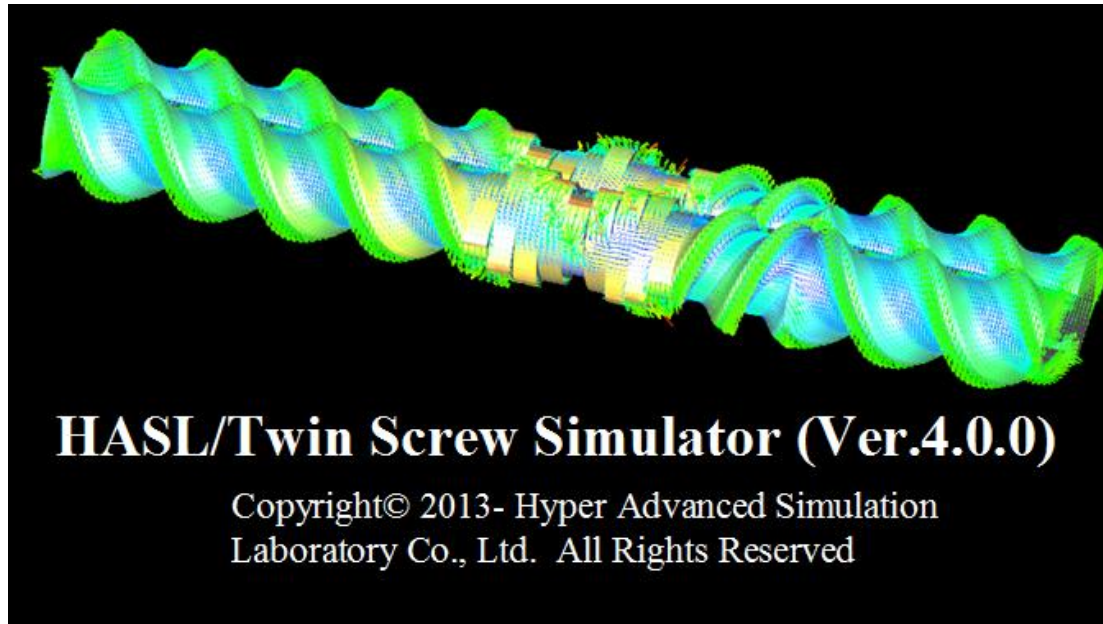


Twin Screw Simulator(Ver.4.0.0) 改良成果資料(発表用ダイジェスト版)

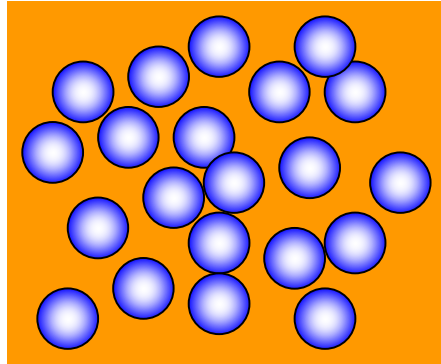


2016/11/25

株式会社HASL

- ① 高濃度サスペンション溶融可塑化解析モデル
- ② 繊維破断解析モデル
- ③ ひずみ計算モデル
- ④ Morphological Evolution Model
- ⑤ Chemical Reaction Model
- ⑥ 計算要素編集機能の強化

① 高濃度サスペンション溶融可塑化解析モデル



● 未溶融ペレット(球体にモデル化)

■ 溶融体

未溶融ペレットを含む溶融体を粘度 η の濃厚サスペンションとしてモデル化

$$\eta = \eta_r \eta_l$$

サスペンション粘度

相対粘度

溶融体粘度

Einstein model (希薄系)

$$\eta_r = 1 + [\eta]\phi$$

Krieger-Dougherty model^{*)}(濃厚系)

$$\eta_r = \left(1 - \frac{\phi}{\phi_m}\right)^{-[\eta]\phi_m}$$

$[\eta]$: 固有粘度 (球の場合2.5)

ϕ : 粒子体積濃度

ϕ_m : 最密充填体積濃度

$$\phi_m = \frac{\pi}{\sqrt{18}} \cong 0.74$$

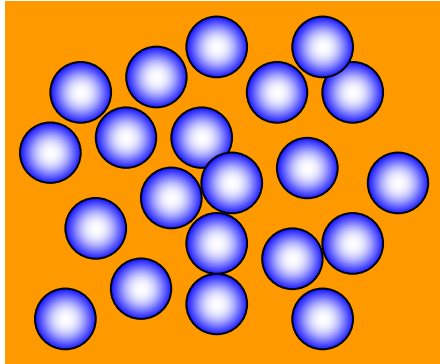
Face centered cubic

ケプラー予想: 球に対してこの配置が最密充填(1611年)、
2014年8月10日にヘイルズ(ミシガン大学)らによって証明完結

$\phi_m \cong 0.64$ Random close packing

^{*)}参考文献: I. M. Krieger and T. J. Dougherty, Trans.Soc.Theol.,3,137-152(1959)





単位体積 V 内に半径 R の球が n 個含まれていることを想定すると、

$$\phi(0) = n \frac{4}{3} \pi R(0)^3 / V = \frac{\rho_b}{\rho_s}$$

ρ_s : 固体密度
 ρ_b : 嵩密度

1) 二軸スクリュ内に投入されるペレットは、下流側に搬送される過程で溶融が促進されて大きさが変化するが、単位体積 V 内の個数は変化しないと仮定する。

$$\phi(t) = \left(\frac{R(t)}{R(0)} \right)^3 \phi(0) = \left(\frac{R(t)}{R(0)} \right)^3 \frac{\rho_b}{\rho_s}$$

2) ペレットは、周囲の溶融樹脂(温度 T_l)からの熱流束の影響を受けて溶融が促進される。

球対称非定常熱伝導方程式

(ペレットの温度状態を決定する支配方程式)

$$\rho_s C_{ps} \frac{DT_s}{Dt} = \frac{\kappa_s}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T_s}{\partial r} \right)$$

ρ_s : 密度 T_s : 温度 T_{av} : 平均温度

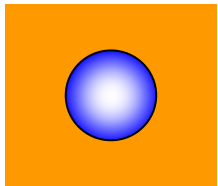
C_{ps} : 比熱 t : 時間

κ_s : 熱伝導率 r : 半径

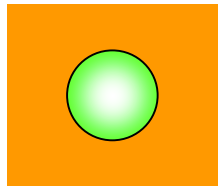
h_{sl} : ペレット/溶融樹脂間熱伝達係数

T_l : 溶融樹脂温度 T_m : 溶融温度 λ : 潜熱

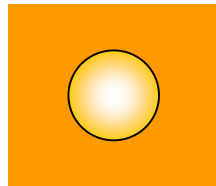
昇温フェーズ ($R=R_0$: 初期半径)



初期時刻 $t=0$



$0 < t < t_m$

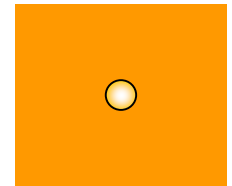
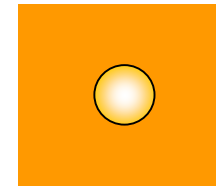
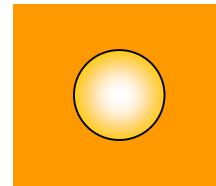


溶融開始時刻 t_m
 $T(R, t_m) = T_m$

温度境界条件:

$$\kappa_s \frac{\partial T_s}{\partial r} \Big|_{r=R} = h_{sl} (T_f - T_s) \Big|_{r=R}, \quad \frac{\partial T_s}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0$$

溶融フェーズ ($DR/Dt < 0$)



$t_m < t$

温度境界条件: $T_s|_{r=R} = T_m, \quad \frac{\partial T_s}{\partial r} = 0$

Melting front 運動学的条件式:

$$\kappa_s \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R} = h_{sl} (T_f - T_m) + \rho_s (C_{ps} (T_m - T_{av}) + \lambda) \frac{DR}{Dt}$$

計算例

Computational conditions

Spherical initial radius (m)

Division number

Time increment (sec)

Computational cycle

Graphplot interval

Initial temperature (°C)

Timer time interval(μs)

Liquid temperature(°C)

Heat transmission (W/m2/K)

Melting calculation

Physical properties

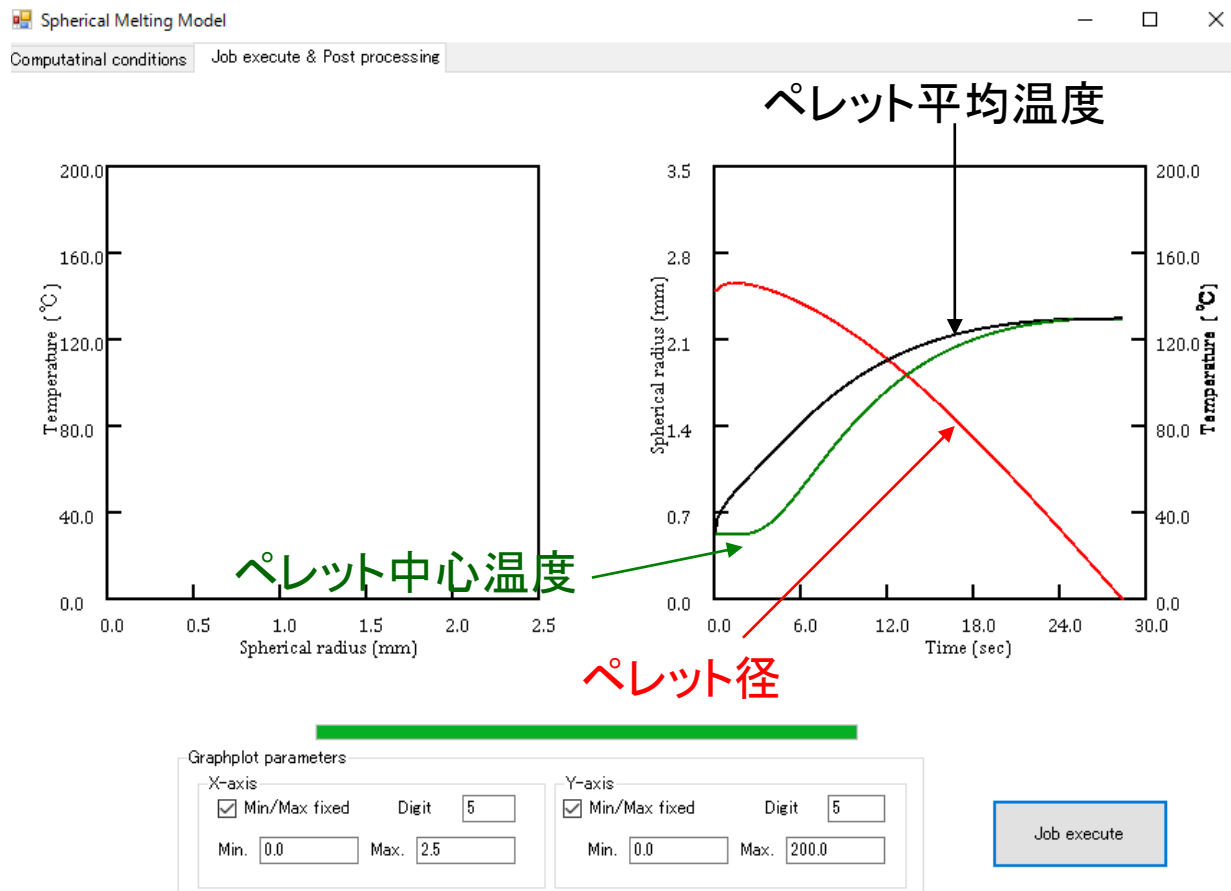
Density (kg/m3)

Heat capacity (J/kg/K)

Thermal conductivity (W/m/K)

Melt temperature (°C)

Latent heat (J/kg)



非定常熱伝導方程式(円柱座標系)

(溶融体の温度状態を決定する支配方程式)

固体ペレット／溶融体間の熱交換

$$\rho_l C_{pl} \left(\frac{\partial T_l}{\partial t} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial T_l}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial T_l}{\partial z} \right) = \frac{\kappa_l}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_l}{\partial r} \right) + \eta \dot{\gamma}^2 + \frac{n}{V} h_{sl} (T_s - T_l) 4\pi R^2$$

熱対流

熱伝導

粘性発熱

熱伝達 $\frac{3\phi(t)}{R(t)} h_{sl} (T_s - T_l)$

二軸スクリュウの特徴に着目した仮定

$$v_r \ll v_z, v_\theta$$

$$\frac{\partial T_l}{\partial z}, \frac{\partial T_l}{\partial \theta} \ll \frac{\partial T_l}{\partial r}$$

ρ_l : 密度

T_l : 温度

C_{pl} : 比熱

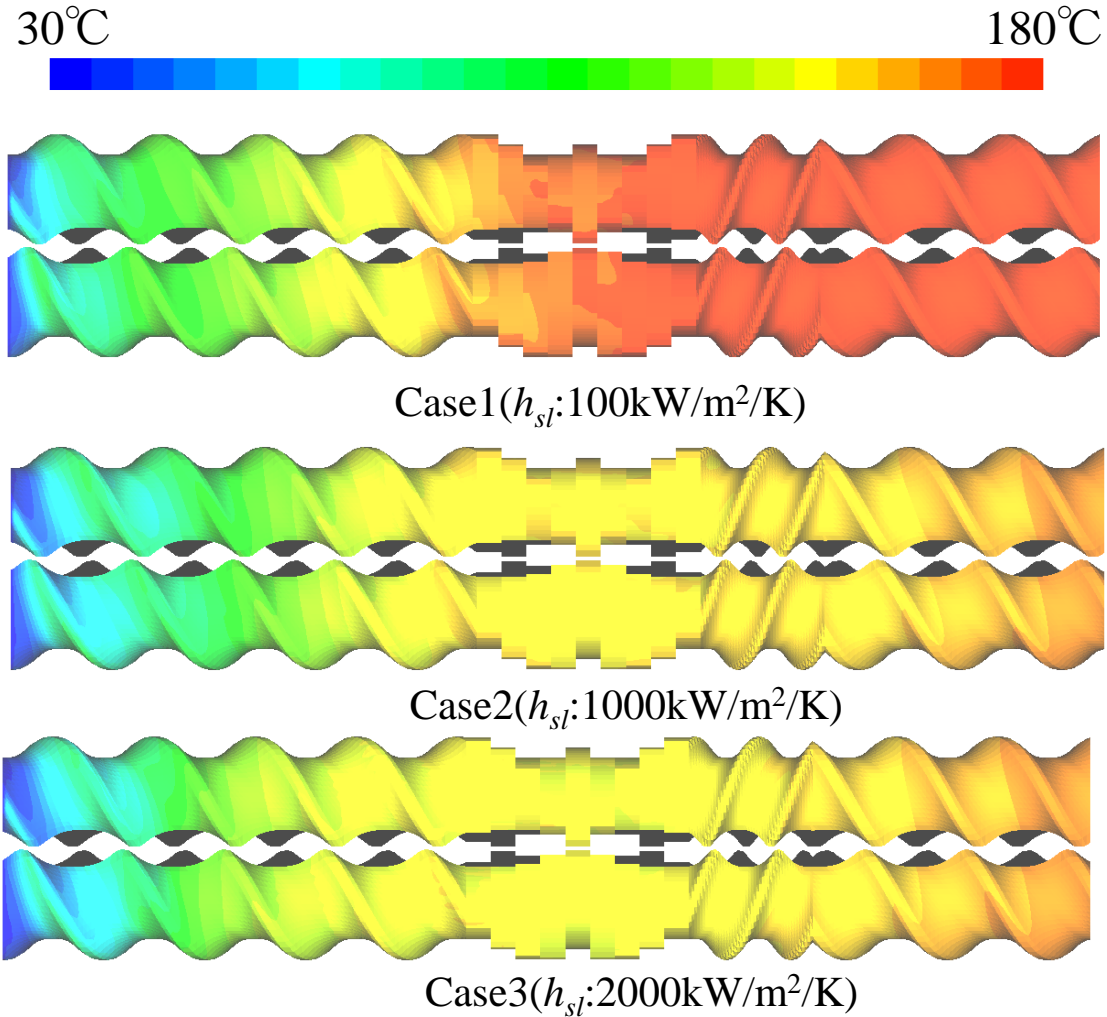
t : 時間

κ_l : 熱伝導率

η : 粘度

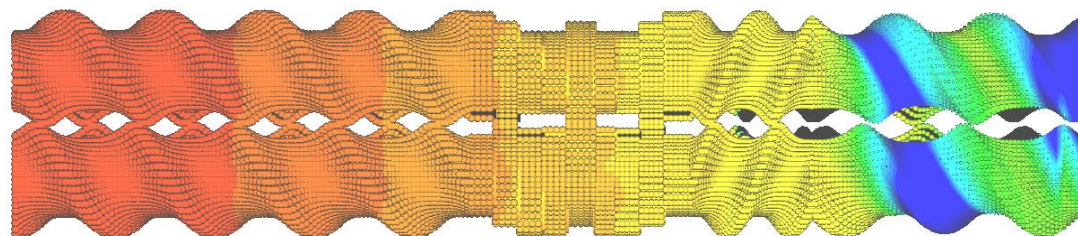
$\dot{\gamma}$: ひずみ速度

熔融樹脂溫度分布解析結果

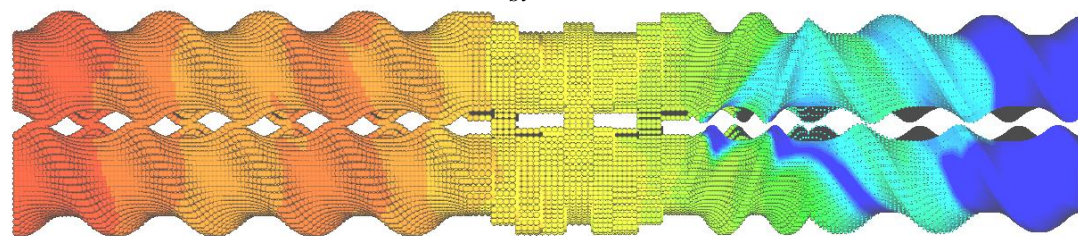


ペレット半径分布解析結果

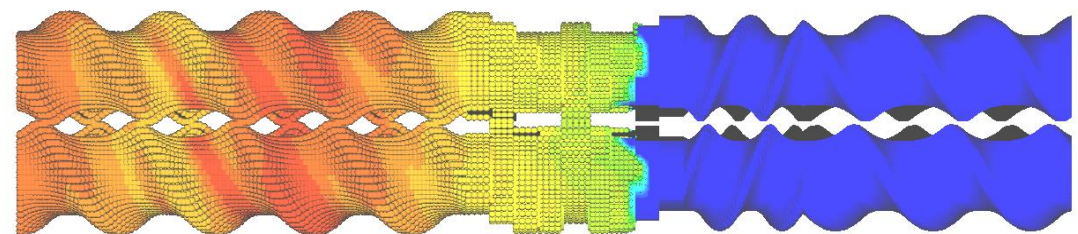
0.0 mm 1.5 mm



Case1(h_{sl} :100kW/m²/K)

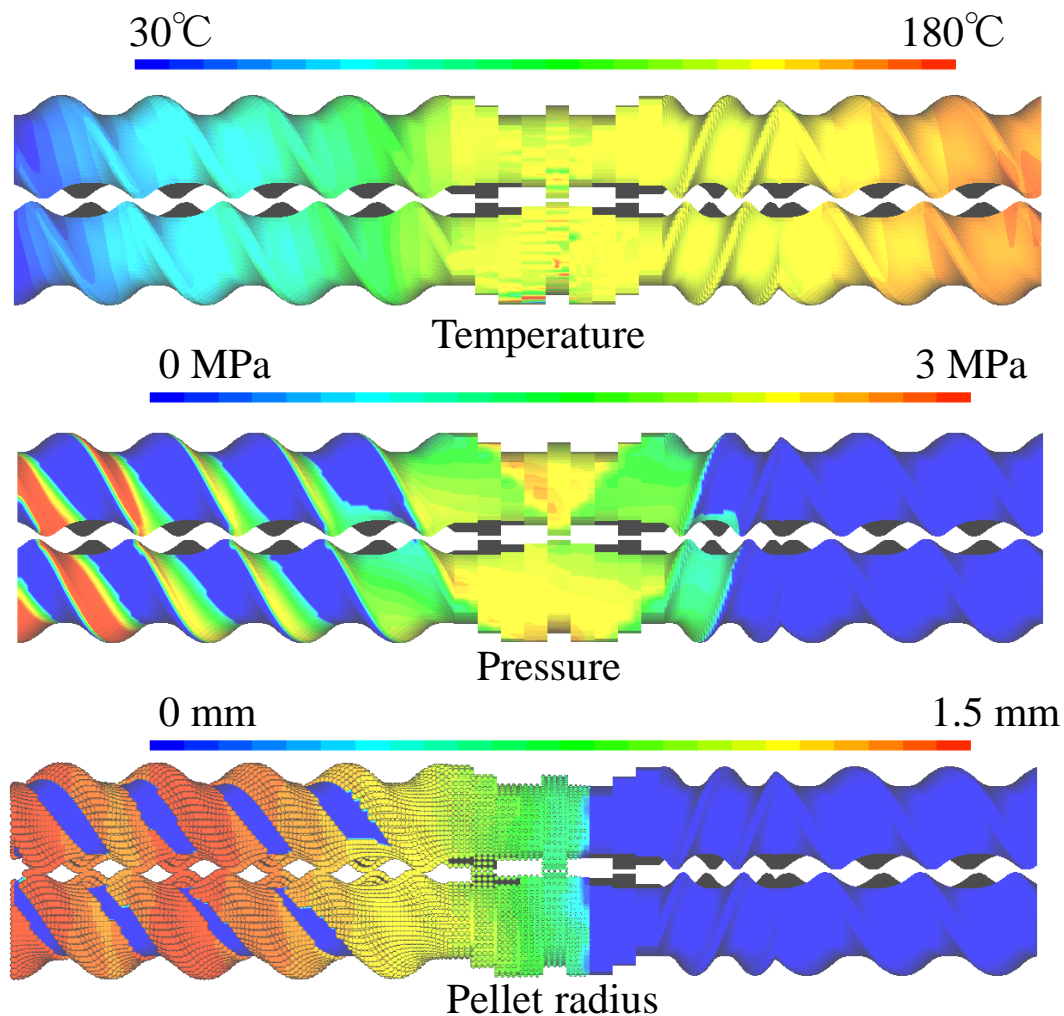


Case2(h_{sl} :1000kW/m²/K)



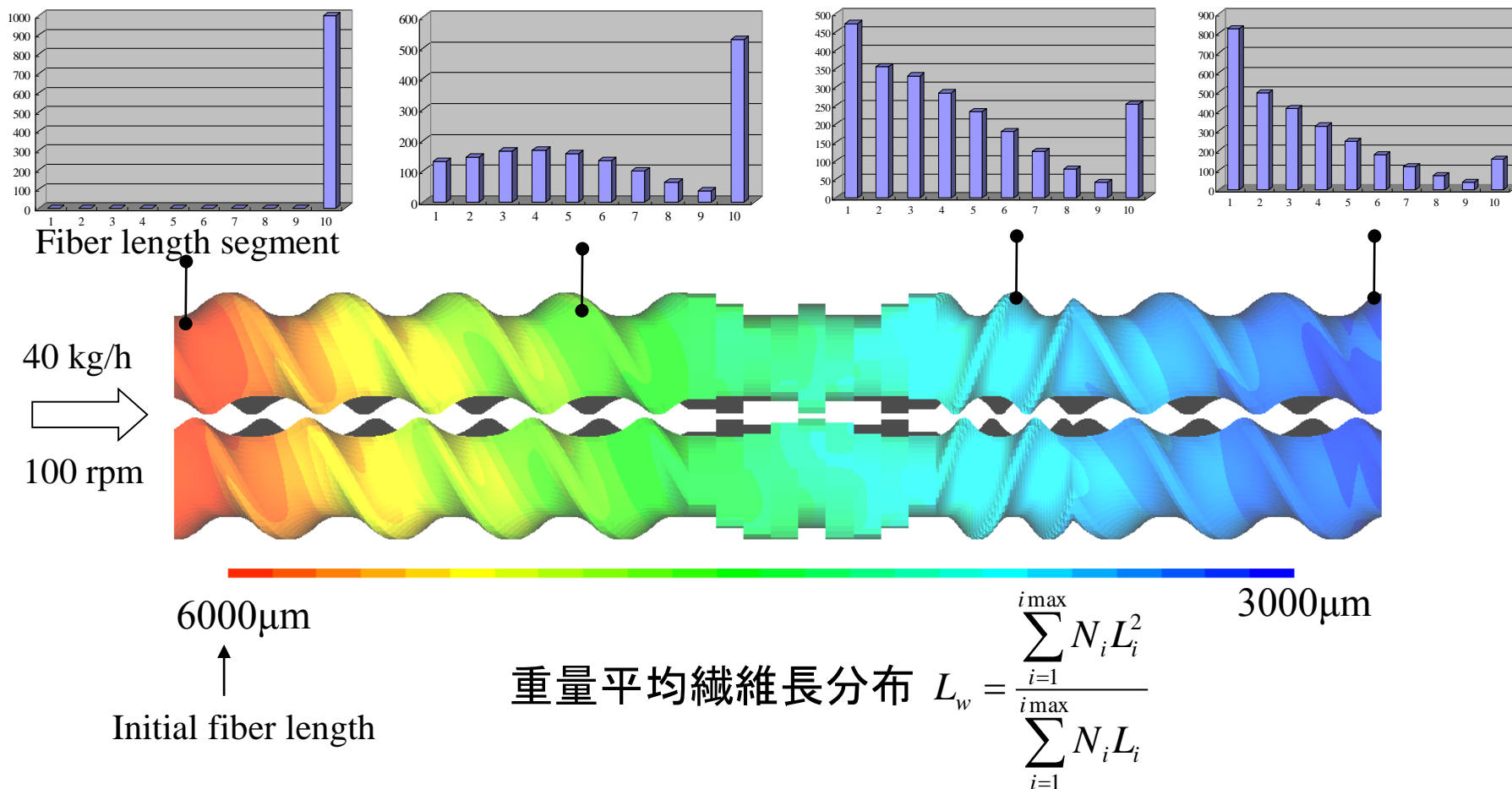
Case3(h_{sl} :2000kW/m²/K)

未充満 & 溶融モデルCase4($h_{sl}: 1000 \text{ kW/m}^2/\text{K}, 30 \text{ kg/h}$)解析結果

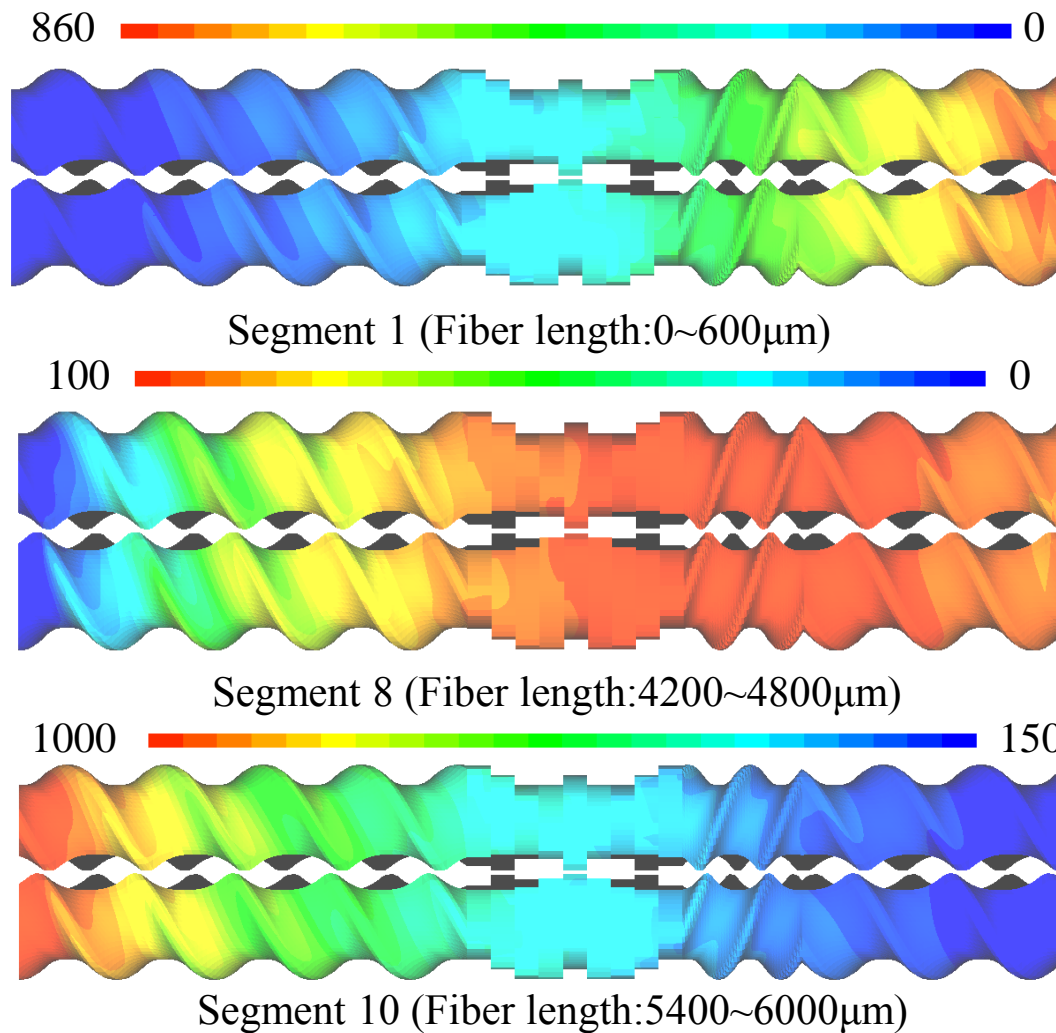


② 繊維破断解析モデル (昨年SSSに実装した新機能を移植)

二軸スクリュ内繊維長分布の定量化例



纖維長分布解析結果



③ ひずみ計算モデル

既往

$$\gamma(t) = \int_0^t \dot{\gamma} dt$$

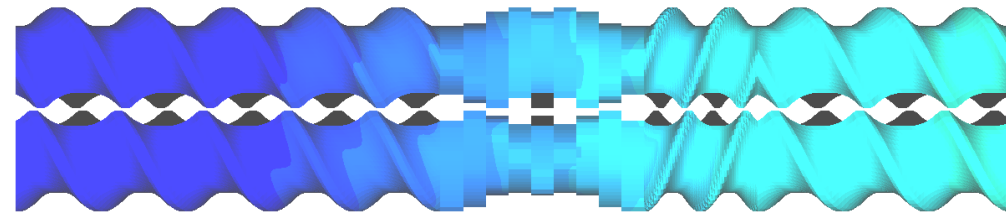
トレーサ粒子の運動解析結果として得られる離散情報(統計情報)として評価。

新規

$$\frac{D\gamma}{Dt} = \dot{\gamma}$$

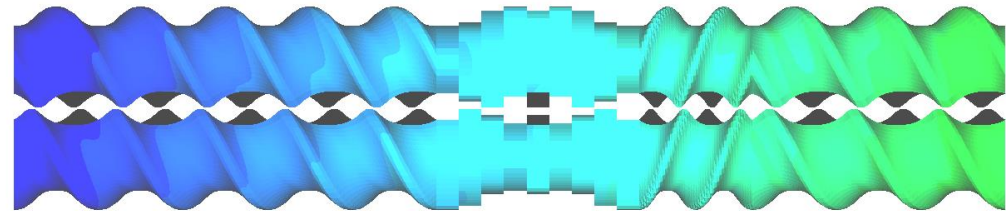
輸送方程式の解析結果として得られる連続量(場の量)として評価。

ひずみ計算例



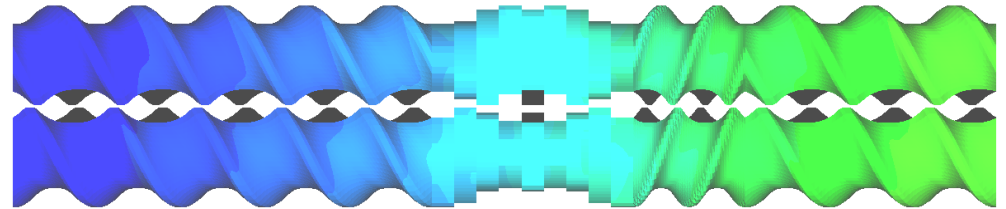
20kg/h,100rpm,未充满(背压5MPa)

Max.1715.025



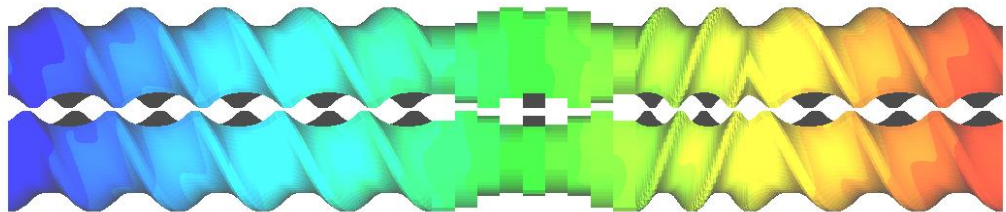
20kg/h,100rpm,充满

Max.2773.388



20kg/h,200rpm,未充满(背压5MPa)

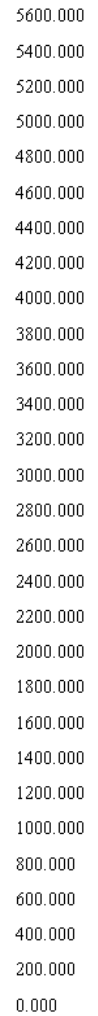
Max.3188.133



20kg/h,200rpm,充满

Max.5667.629

Strain



④ Morphological Evolution Model

液滴の分裂状態を規定するキーパラメータ: Capillary number

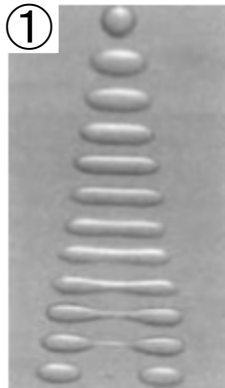
$$Ca = \frac{\eta_m \dot{\gamma}}{\sigma / R} = \frac{\textit{Shear stress}}{\textit{Surface tension}}$$

η_m : マトリクス粘度

$\dot{\gamma}$: マトリクスひずみ速度

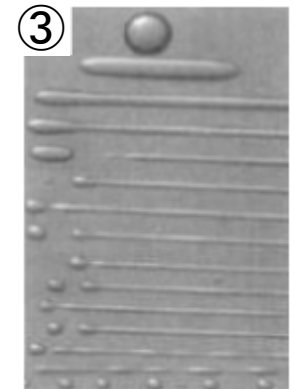
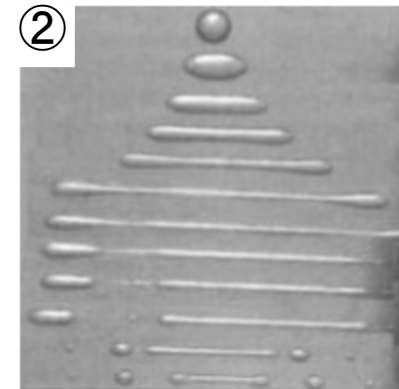
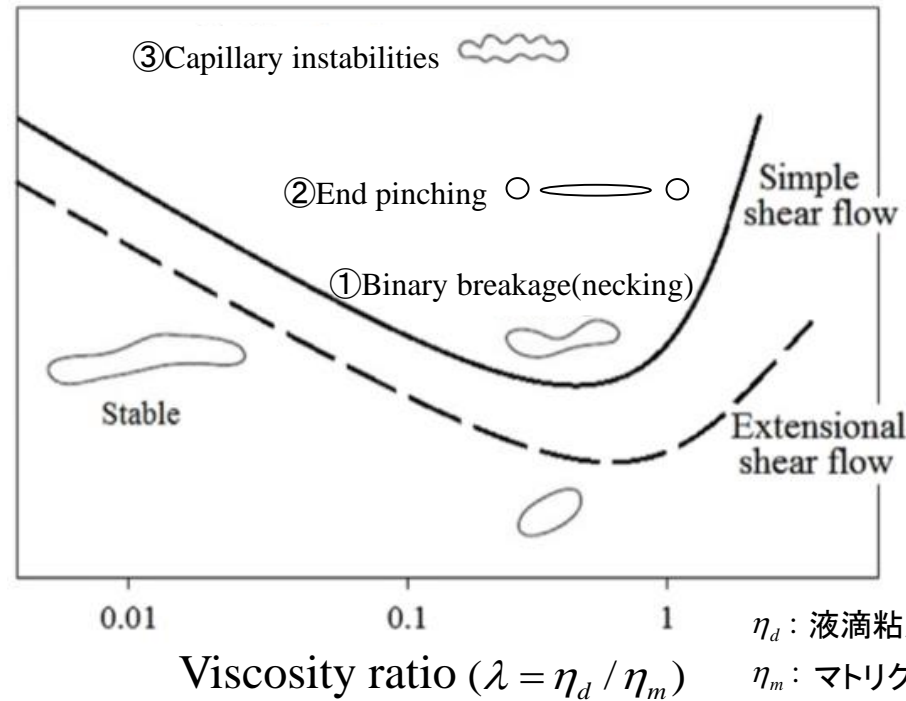
σ : 表面張力係数

R : 液滴半径



せん断流動場内の液滴の変形状態**)

Critical capillary number (Ca_{crit})



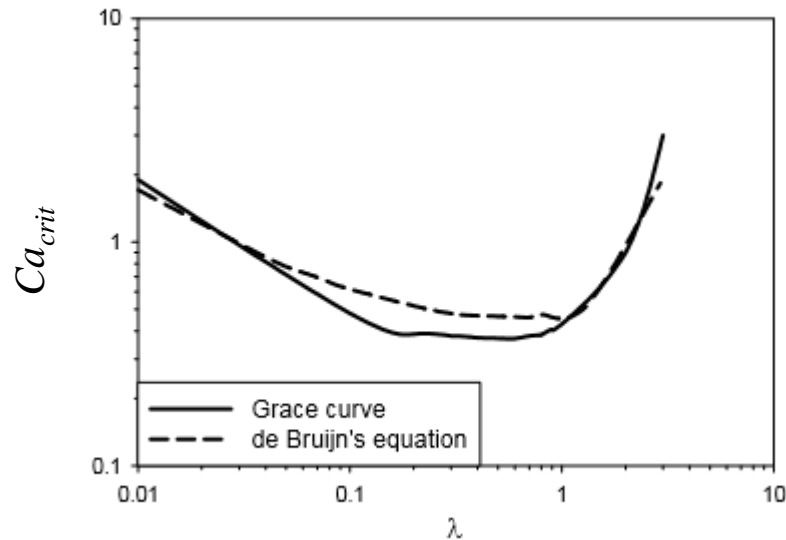
臨界キャピラリー数の粘度比依存性*)

*) 出典: H. P. Grace : *Eng. Found. Res. 3rd Conference on Mixing*, Andover(1971)

***) 出典: LIU, H., XU, X.M., GUO, S.D., : *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 15(1),1-5 (2007)

臨界キャピラリー数に対するBruijnの経験則評価式*):

$$\log(Ca_{crit}) = -0.5060 - 0.0994 \log \lambda + 0.1240 (\log \lambda)^2 - \frac{0.1150}{\log \lambda - 0.6110}$$



Grace curve のBruijn モデルフィット*)

*) 出典 : R. A. De Bruijn, PhD thesis, Eindhoven University of Technology, The Netherlands (1989)

規格化キャピラリー数による液滴状態の分類^{*})

$C^* = Ca / Ca_{crit}$	液滴の状態
$C^* < 0.1$	液滴は、変形しない。
$0.1 < C^* < 1$	液滴は、変形するが、分裂しない。
$1 < C^* < 4$	液滴は、変形し、2つに分裂する。
$4 < C^*$	液滴はフィラメント化し、その後、複数に分裂する。

注)フィラメント化した後に分裂する液滴径は、粘度比に依存し、 $0.1 < \lambda < 1$ の場合は均一、 $1 < \lambda$ の場合は不均一になる。^{**)}

^{*}) 参考文献: M.A. Huneault, Z. H. Shi, and L.A. Utracki : *Polym. Eng. Sci.* **35**(1),115(1995)

^{**}) 参考文献: S. Maindarkar, A. Dubbleboer, and J. Meuldijk, H. Hoogland, and M. Henson: *Polym. Eng. Sci.* **118**,114(2014)

Morphological Evolution Model^{*)}

液滴の単位体積当たりの分裂/合体に伴う形状(半径)変化を定量化する現象論的計算モデル

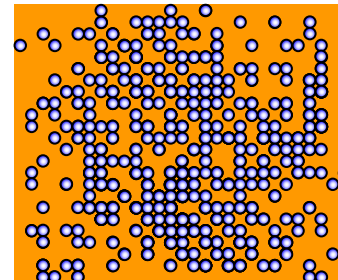
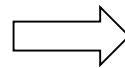
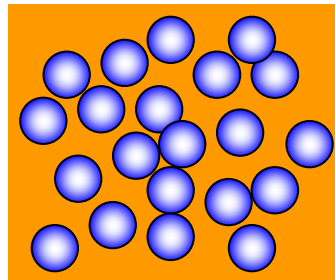
$$\frac{DR}{Dt} = -\frac{\dot{\gamma}R}{3Ca_{crit}t_b^*} + \frac{C_{coalescence}}{R} \phi^{8/3} \dot{\gamma} \quad \text{for } 1 \leq C^* \leq 4$$

↑
液滴半径の
時間変化

↑
分裂に伴う液滴
半径の減少率

↑
合体に伴う液滴
半径の増加率

R : 液滴半径
 t_b^* : 無次元時間
 $\dot{\gamma}$: ひずみ速度
 ϕ : 液滴体積分率 (不変)
 Ca_{crit} : 臨界キャピラリー数
 $C_{coalescence}$: 液滴合体実験観測定数 ($1.5 \times 10^{-12} \text{ m}^2$)

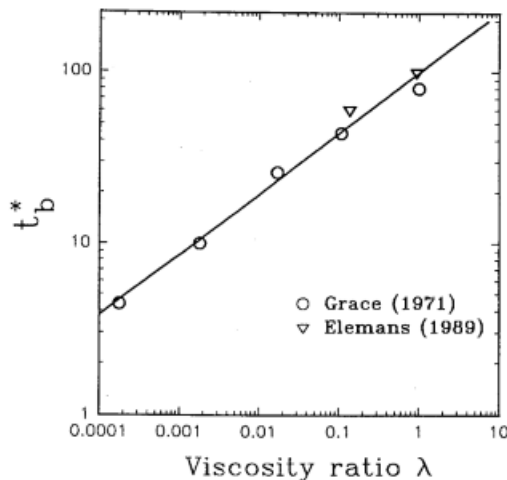


^{*)}参考文献:S. Maindarkar, A. Dubbleoer, and J. Meuldijk, H. Hoogland, and M. Henson: *Polym. Eng. Sci.* **118**,114(2014)

$$\frac{DR}{Dt} = 0 \quad \text{for } C^* < 1$$

$$R(t + \Delta t) = 2\sqrt{\frac{2}{3}}R(t)\gamma(t:t + \Delta t)^{-\frac{1}{2}} \quad \text{for } 4 < C^*$$

無次元パラメータ t_b^* は液滴分裂の実験観測結果より決定



$$\log_{10}(t_b^*) = 0.3396\log_{10}(\lambda) + 1.9604$$

粘度比と無次元分裂時間の関係

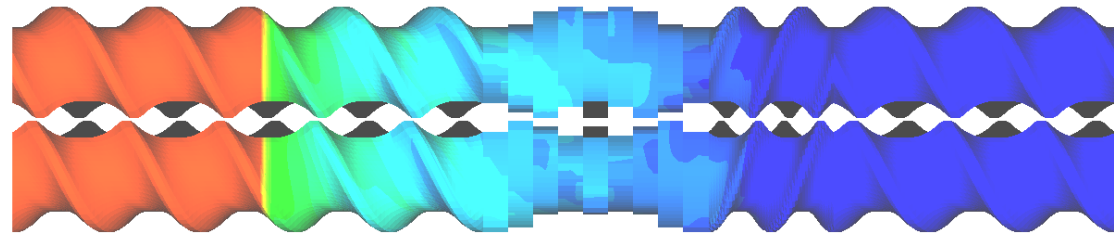
液滴径解析結果

液滴径 v.s.
表面張力係数



0.500 0.480 0.460 0.440 0.420 0.400 0.380 0.360 0.340 0.320 0.300 0.280 0.260 0.240 0.220 0.200 0.180 0.160 0.140 0.120 0.100

Droplet radius (μm)
Min. 0.1
Max. 0.5

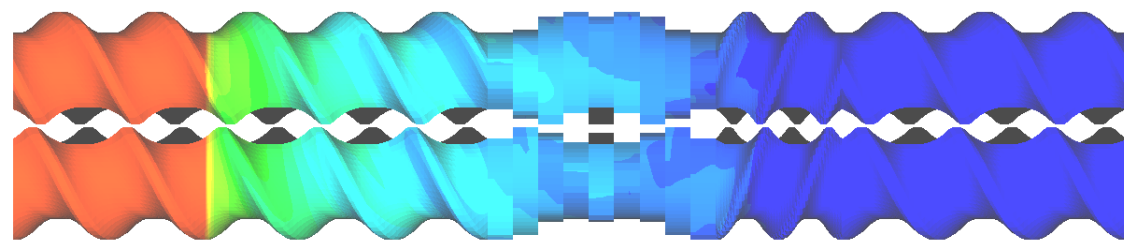


$\sigma: 0.04 \text{ (N/m)}$



5.000 4.800 4.600 4.400 4.200 4.000 3.800 3.600 3.400 3.200 3.000 2.800 2.600 2.400 2.200 2.000 1.800 1.600 1.400 1.200 1.000

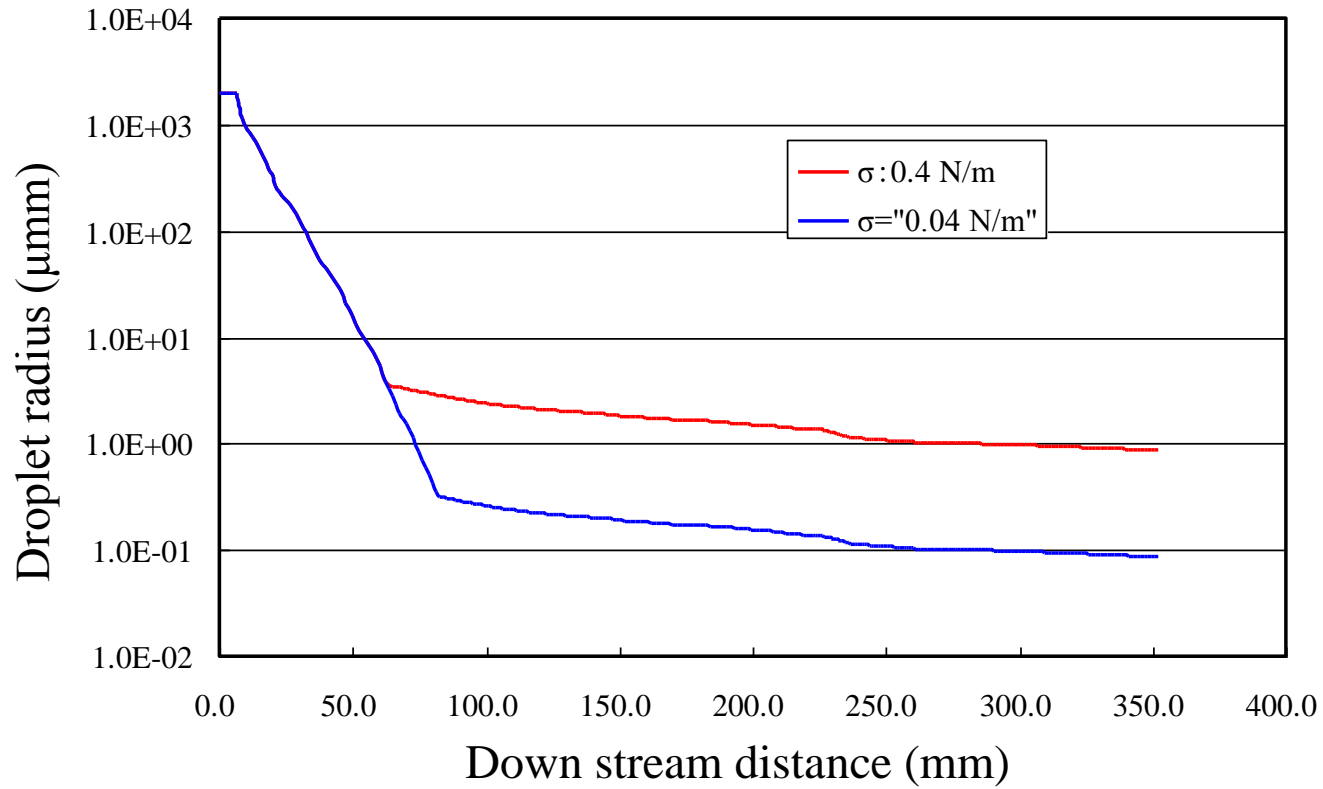
Droplet radius (μm)
Min. 1.0
Max. 5.0



$\sigma: 0.4 \text{ (N/m)}$

液滴径分布

$R_0 = 2000(\mu\text{m})$,
 $\eta_m = 300(\text{Pa}\cdot\text{s})$,
 $\eta_d = 600(\text{Pa}\cdot\text{s})$,
 $\Omega = 100\text{rpm}$,
 $Q = 50\text{kg/h}$,
Filled analysis



周方向平均液滴径分布

液滴径 v.s. 充满率

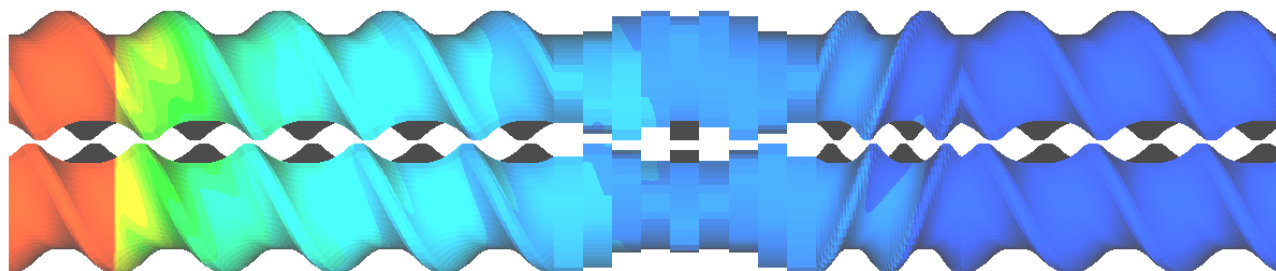


Droplet radius (μm)

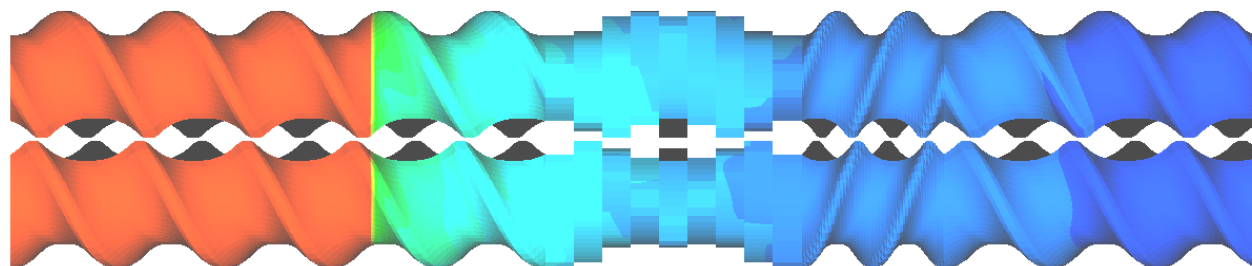
Min. 0.0

Max. 0.5

0.500 0.475 0.450 0.425 0.400 0.375 0.350 0.325 0.300 0.275 0.250 0.225 0.200 0.175 0.150 0.125 0.100 0.075 0.050 0.025 0.000



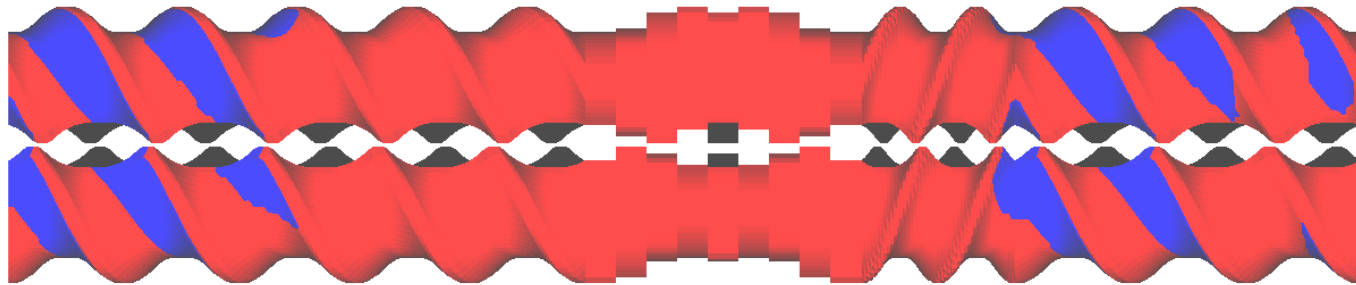
背压Ph:2 (MPa)



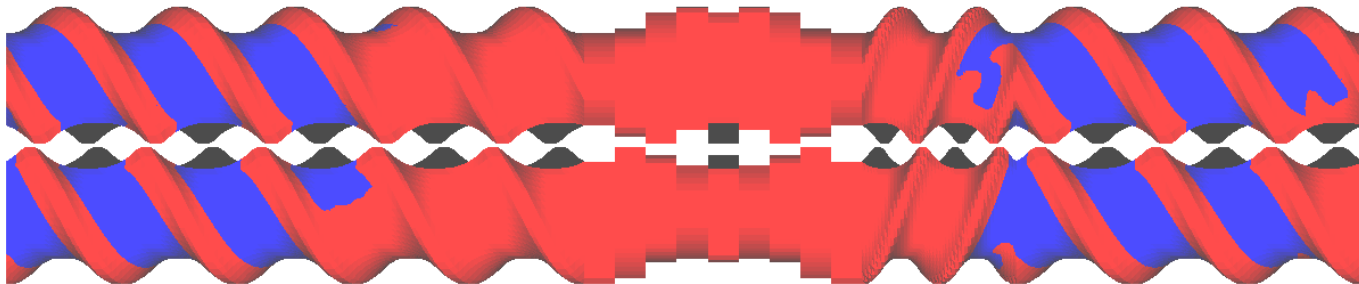
背压Ph:1 (MPa)

液滴径分布

$R_0 = 2000(\mu m)$,
 $\eta_m = 300(Pa \cdot s)$,
 $\eta_d = 600(Pa \cdot s)$,
 $\Omega = 100rpm$,
 $Q = 15kg/h$,
 Un - filled analysis

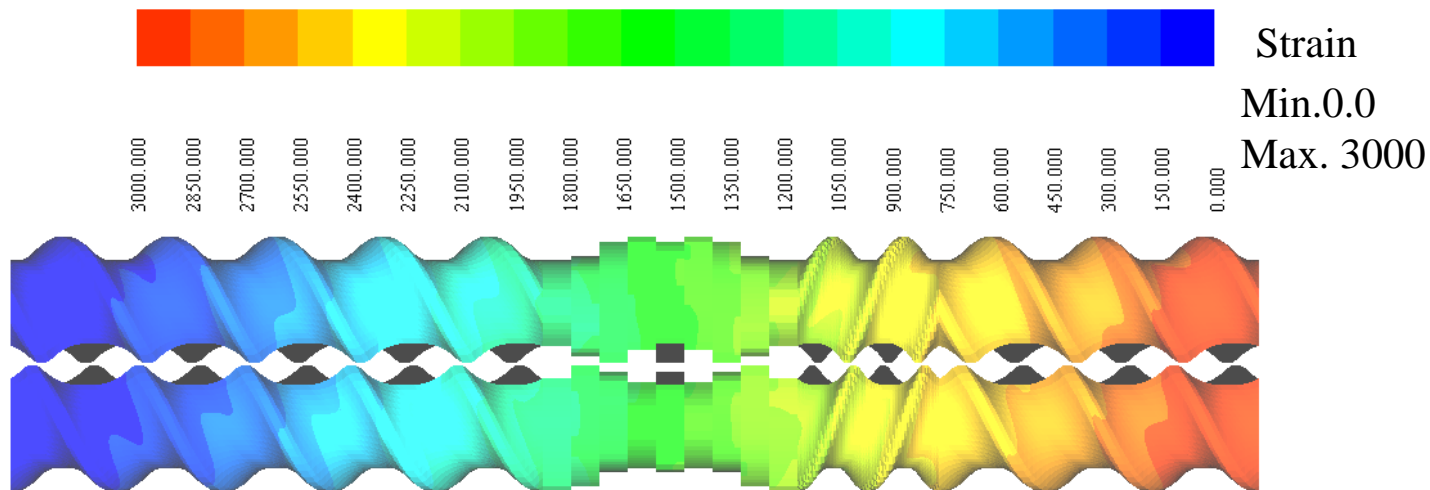


背压Ph:2 (MPa)

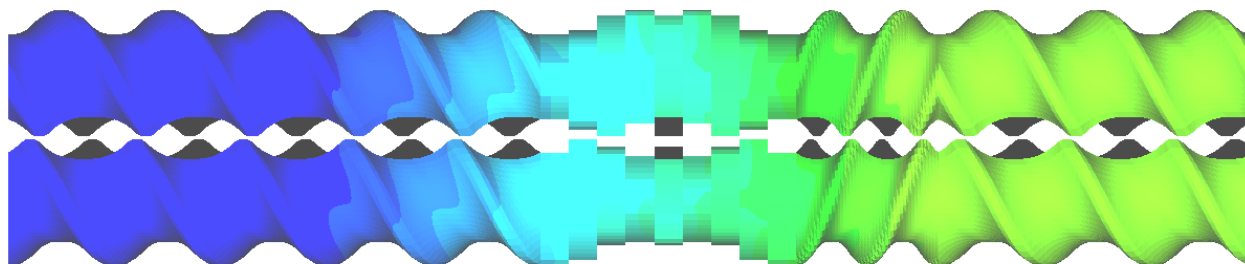


背压Ph:1 (MPa)

充满率分布



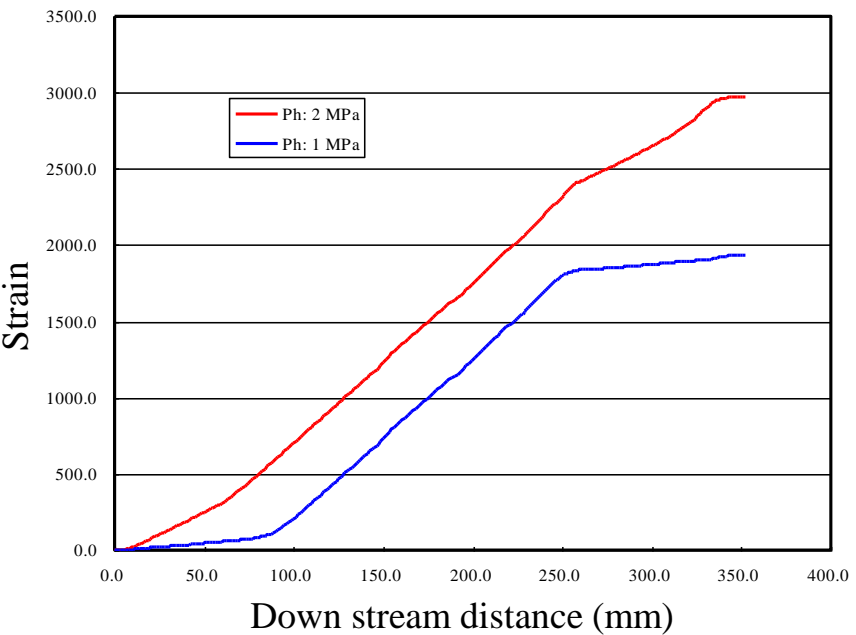
背圧Ph:2 (MPa)



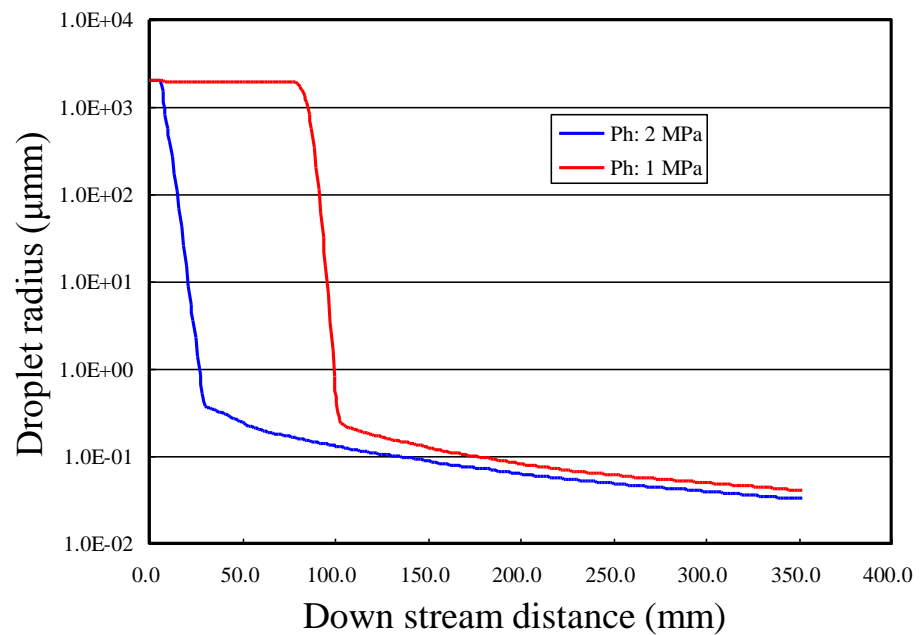
背圧Ph:1 (MPa)

ひずみ分布

$$\gamma = \int_0^t \dot{\gamma} dt \Rightarrow \frac{D\gamma}{Dt} = \dot{\gamma}$$



周方向平均ひずみ分布



周方向平均液滴径分布

⑤ Chemical Reaction Model

$$\frac{D\phi}{Dt} = A \exp\left(-\frac{B}{T}\right),$$

$$\phi > \phi_{\max} \Rightarrow \phi = \phi_{\max}$$

ϕ : 化学反応率

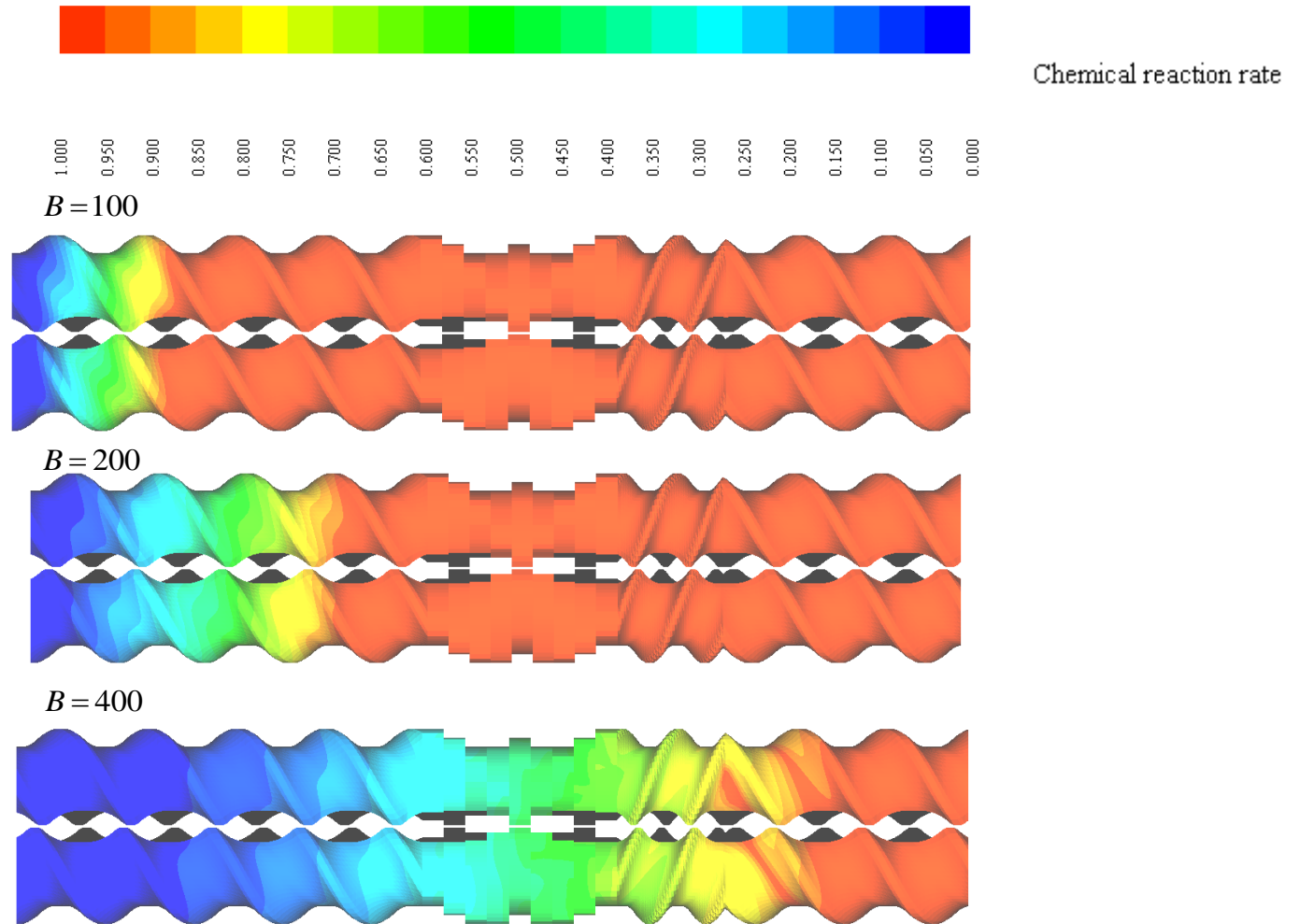
A : 反応モデル定数

B : 反応モデル定数

T : 温度

ϕ_m : 化学反応率上限値

テスト解析例

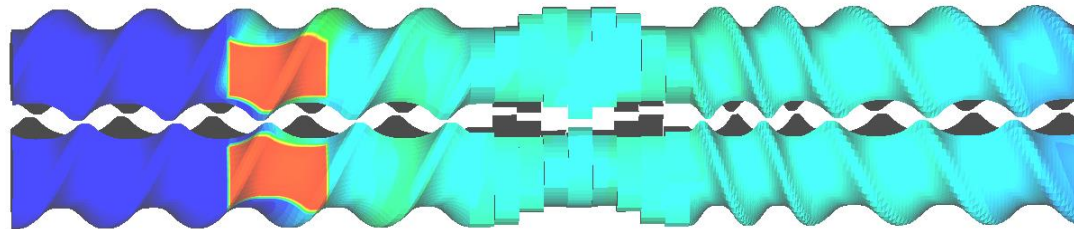


活性化エネルギーが反応率に与える影響を検討するための比較解析結果

Binary concentration



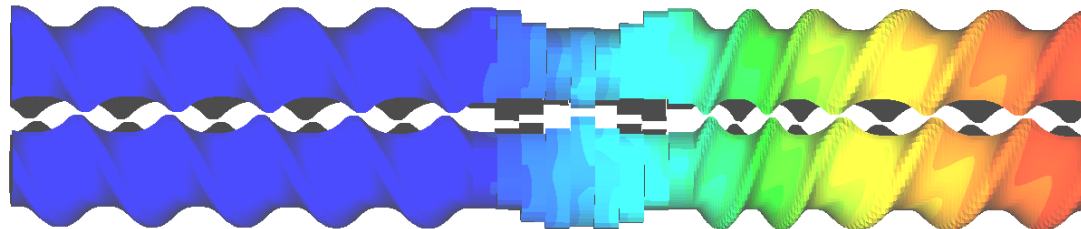
0.500 0.479 0.458 0.438 0.417 0.396 0.375 0.354 0.333 0.313 0.292 0.271 0.250 0.229 0.208 0.188 0.167 0.146 0.125 0.104 0.083 0.063 0.042 0.021 0.000



Chemical reaction rate



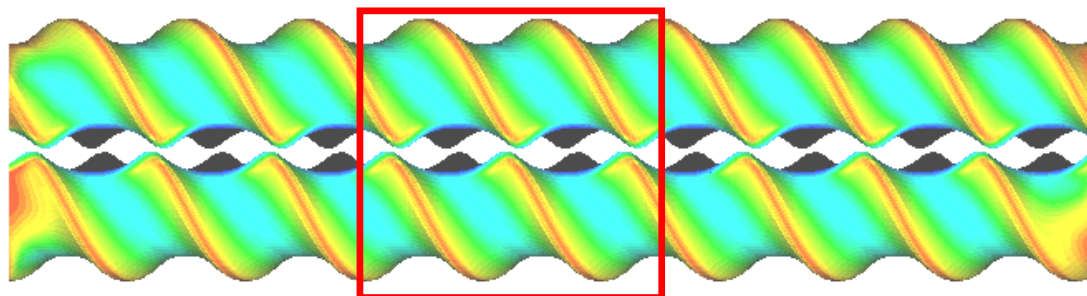
0.363 0.348 0.333 0.318 0.303 0.288 0.272 0.257 0.242 0.227 0.212 0.197 0.182 0.166 0.151 0.136 0.121 0.106 0.091 0.076 0.061 0.045 0.030 0.015 0.000



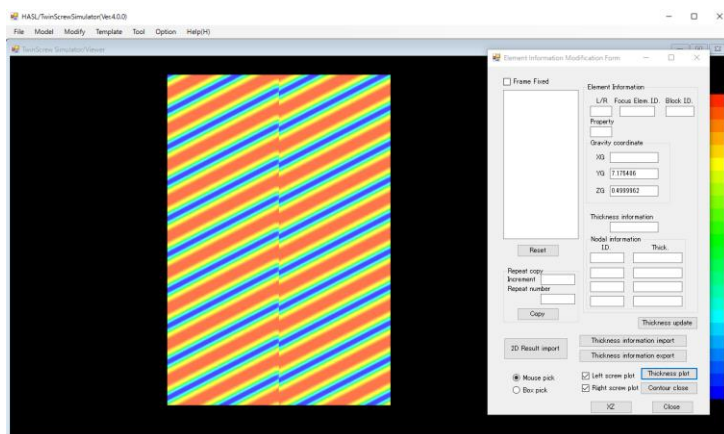
サイドフィード供給材料の化学反応率計算例

⑥ 計算要素編集機能の強化(展開面情報の加筆修正機能)

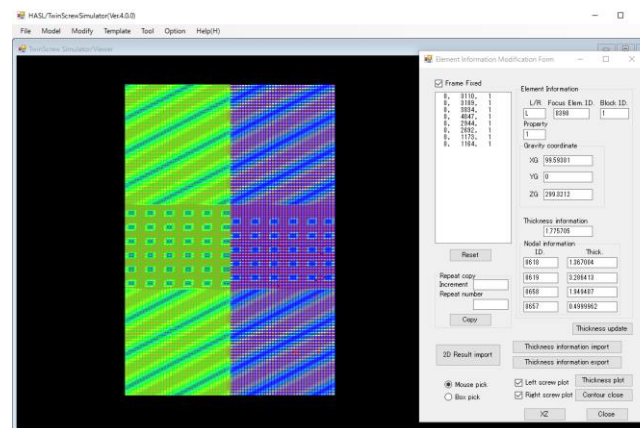
UV mapping
technology



部分的にピンミキシング
エレメントを配置



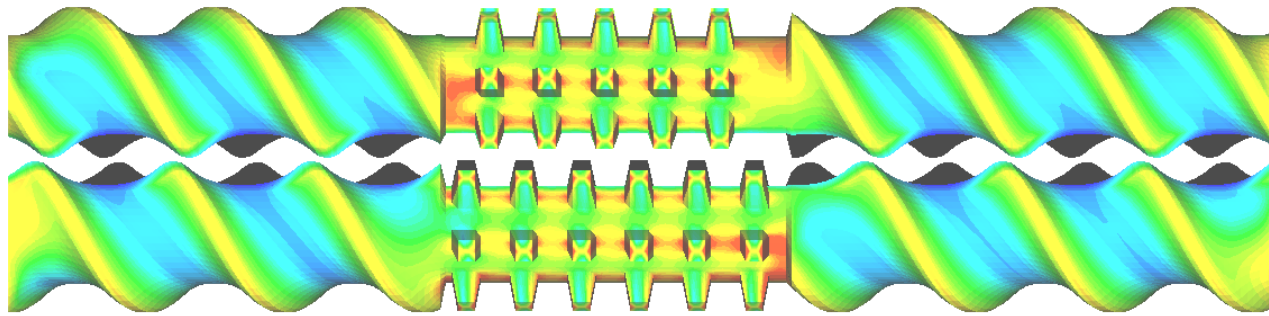
編集



解析

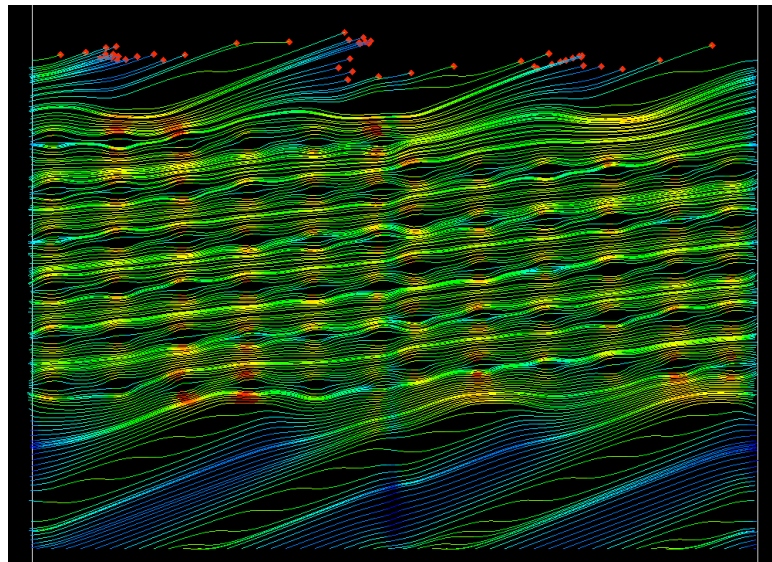
2.5D 解析モデルのUV展開モデル
(Unwound model)のインポート

要素単位で肉厚(流路深さ)を
任意編集(当情報を2.5D解析モデルに写像)



Flow direction

Velocity distribution in a twin screw extruder with pin mixing element



Flow direction

Stream lines around pin mixing element
(Unwound display)